La caracterización de sustancias en química orgánica requiere el análisis de propiedades físicas fundamentales, como el punto de fusión y el punto de ebullición. El punto de fusión es la temperatura a la cual el estado sólido y el estado líquido de una sustancia, coexisten en equilibrio térmico, a una presión de 1 atmósfera; su valor es influenciado directamente por la pureza de la sustancia, observándose que impurezas en el compuesto disminuyen p de fusión. El punto de fusión mixto es una técnica útil para confirmar la identidad de una sustancia al comparar el punto de fusión de la mezcla que se presume puede ser el compuesto con el punto de fusión de compuesto problema.

En paralelo, el punto de ebullición describe la temperatura a la cual la presión de vapor de un líquido iguala la presión atmosférica, facilitando la transición de fase de líquido a gas. Durante el proceso de ebullición la temperatura se mantiene constante, en pocas palabras mientras un líquido hierve, la temperatura no aumenta porque todo el calor se emplea en convertir el líquido en gas. Al realizar esta medición podemos dibujar una curva de presión de vapor que nos muestra cómo cambia la presión de vapor de una sustancia a medida que aumenta su temperatura, proporcionándonos información sobre el punto de ebullición, la volatilidad y su pureza.

Para la caracterización del punto de fusión y ebullición es necesario conocer herramientas como el termómetro. Hay diferentes tipos: los de líquido en vidrio (como los de mercurio o alcohol) que aprovechan la expansión de un líquido al calentarse; los de gas que miden la presión de un gas confinado; los bimetálicos que utilizan la deformación de dos metales al cambiar la temperatura; los de resistencia que miden la variación de la resistencia eléctrica; los termoeléctricos que generan electricidad al variar la temperatura; y los de infrarrojos que miden la radiación infrarroja emitida por un objeto. Además, existe el fusiómetro que utiliza el punto de fusión de una sustancia para determinar la temperatura.

La densidad absoluta, entendida como la masa por unidad de volumen, es otra propiedad física que permite la identificación de sustancias y su relación con la pureza. La densidad relativa es la relación entre la densidad de una sustancia y la de una referencia, comúnmente el agua destilada a 4 °C. Mientras que el peso específico de una sustancia indica cuánto pesa un determinado volumen de esa sustancia y se calcula dividiendo el peso total de una cantidad de la sustancia entre el espacio que ocupa. La densidad también varía con la temperatura, y un control preciso de ésta es esencial para obtener mediciones confiables.

Finalmente, el índice de refracción es otra propiedad importante en la caracterización de sustancias orgánicas, al medir cómo la luz cambia de dirección al pasar a través del medio. Este índice es afectado por la estructura molecular y la pureza de la muestra.